

ТРЕХФАЗНЫЙ АСТРОХИМИЧЕСКИЙ КОД: МОДЕЛИРОВАНИЕ СОСТАВА МОЛЕКУЛЯРНОГО ОБЛАКА

Е. В. Борщева

Институт астрономии Российской академии наук

Описана реализация трехфазной астрохимической модели (газ + поверхность льда + толща ледяной мантии) на основе двухфазного кода Presta (газ + поверхность пыли), представлены результаты моделирования химического состава молекулярного облака. Химический состав, получаемый в двух- и трехфазной моделях, существенно различен, в частности, содержание льда CO в трехфазной модели демонстрирует хорошее согласие с наблюдательными данными в отличие от двухфазной модели.

THE THREE-PHASE ASTROCHEMICAL CODE: MODELING OF THE MOLECULAR CLOUD COMPOSITION

E. V. Borshcheva

Institute of Astronomy, Russian Academy of Sciences

We describe the implementation of a three-phase astrochemical model (gas + ice surface + bulk) based on the two-phase Presta code (gas + dust surface) and provide results for calculating the molecular cloud composition. The two- and three-phase models produce significantly different chemical compositions. In particular, CO ice abundance in the three-phase model shows good agreement with the observational data, unlike the two-phase model.

Введение

Процесс звездообразования начинается со сжатия молекулярного облака, поэтому для понимания эволюции на более поздних фазах этого процесса важно корректно моделировать химический состав уже самих молекулярных облаков. По наблюдениям протозвездных объектов [1, 2] наибольшее содержание в ледяных мантиях пылинок имеет водяной лед (gH_2O , где «g» означает, что речь идет о поверхностных веществах); концентрации каждого из льдов gCO и gCO_2 по отношению к концентрации водяного льда составляют порядка 10–30 %, а концентрация льда метанола (gCH_3OH) 3–4 %.

В работе [3], посвященной химическому моделированию вспышек светимости молодых солнцеподобных звезд, химический состав молекулярного облака рассчитывается с помощью астрохимического кода Presta, основанного на базе данных ALCHEMIS [4]. В этой двухфазной модели рассматриваются газофазные и поверхностные реакции наряду с процессами адсорбции вещества на пыль и десорбции из ледяных мантий пылинок. В настоящей работе описана реализация трехфазной модели на основе имеющейся двухфазной и представлены результаты моделирования химического состава молекулярного облака. Сетки газофазных и поверхностных реакций в трехфазной модели, а также формулы расчета скоростей этих реакций совпадают с таковыми в исходной модели Presta.

Трехфазная астрохимическая модель

В основе трехфазной астрохимической модели лежит двухфазная модель Presta [3], где численно решаются уравнения химической кинетики. Численные концентрации газофазных $n(i)$ и поверхностных $n_s(i)$ веществ (см^{-3}) подчиняются соотношениям

$$\begin{aligned} \frac{dn(i)}{dt} = & \sum_{j,l} K_{jl} n(j) n(l) - n(i) \sum_j K_{ij} n(j) + \sum_j K_j^e n(j) - \\ & - K_i^e n(i) - k_{ads}(i) n(i) + k_{des}(i) n_s(i), \quad (1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{dn_s(i)}{dt} = & \sum_{j,l} k_{jl} n_s(j) n_s(l) - n_s(i) \sum_j k_{ij} n_s(j) + \sum_j k_j^e n_s(j) - \\ & - k_i^e n_s(i) + k_{ads}(i) n(i) - k_{des}(i) n_s(i). \quad (2) \end{aligned}$$

Здесь K_{ij} и k_{ij} — газофазные и поверхностные коэффициенты скорости реакций между веществами i и j , K_i^e и k_i^e — газофазные и поверхностные коэффициенты скорости реакций, обусловленных внешними факторами, $k_{ads}(i)$ и $k_{des}(i)$ — коэффициенты скорости реакций адсорбции на космическую пыль и десорбции с пыли для вещества i .

В трехфазной модели вещество на пыли разделяется на вещество поверхности пыли с концентрацией $n_s(i)$ и вещество толщи мантии с концентрацией $n_m(i)$. Численные концентрации вещества толщи мантии подчиняются уравнениям, аналогичным уравнению (2), однако без слагаемых, отвечающих за адсорбцию и десорбцию. Реакции в глубинных слоях мантии замедляются по сравнению с поверхностью; в нашей модели энергия диффузии вещества i в мантии связана с его энергией десорбции соотношением $E_{swap}(i) : E_{des}(i) = 0.7$ [5].

В случае увеличения общей концентрации вещества на поверхности пыли ($[dn_s/dt]_{chem} = \sum_i [dn_s(i)/dt]_{chem} > 0$) количество вещества, перераспределяемого с поверхности мантии в ее толщу [6], задается выражением

$$\left[\frac{dn_s(i)}{dt} \right]_{tran} = \alpha_{ads} \left[\frac{dn_s}{dt} \right]_{chem} \cdot \frac{n_s(i)}{n_s}, \quad (3)$$

где $[dn_s(i)/dt]_{chem}$ — изменение концентрации поверхностного вещества i в результате химических реакций и адсорбции/десорбции; $n_s = \sum_i n_s(i)$ — общая концентрация вещества на поверхности пыли; $\alpha_{ads} = N_s/N_{site}$ — отношение общего числа молекул на поверхности одной пылинки к среднему числу сайтов для адсорбции на пылинке.

При уменьшении общей концентрации вещества на поверхности пыли «перенос» вещества из толщи мантии на поверхность определяется выражением

$$\left[\frac{dn_s(i)}{dt} \right]_{tran} = \alpha_{des} \left[\frac{dn_s}{dt} \right]_{chem} \cdot \frac{n_m(i)}{n_m}, \quad (4)$$

где $n_m = \sum_i n_m(i)$ — концентрация вещества в толще льда; здесь $\alpha_{des} = \min(n_m/n_s, 1)$ [7].

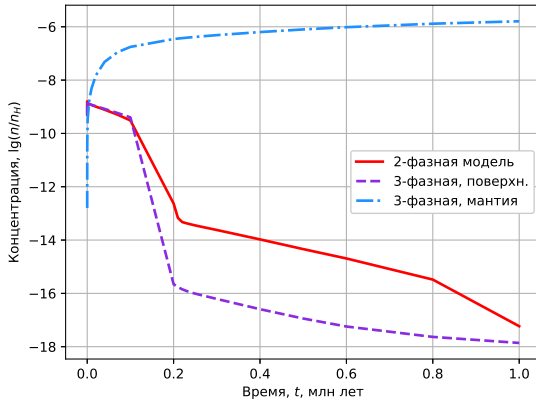
Возможен и физический обмен между веществом толщи мантии и поверхности — диффузия [5]. Уменьшение концентрации вещества i в толще мантии посредством диффузии на поверхность рассчитывается как $R_{swap,m}(i) = N_m(i) \cdot k_{swap}(i) \cdot \min(N_s/N_m, 1)$, где $N_m = \sum_i N_m(i)$ — общее число молекул в толще мантии одной пылинки, а коэффициент диффузии дается формулой $k_{swap}(i) = \nu_0(i) \cdot \exp(-E_{swap}(i)/T_d)$, в которой $\nu_0(i)$ — характеристическая вибрационная частота гармонического осциллятора, T_d — температура пыли. Уменьшение концентрации вещества i в поверхностных слоях посредством диффузии в глубинные слои мантии рассчитывается как $R_{swap,s}(i) = N_s(i)/N_s \cdot \sum_j R_{swap,m}(j)$.

Таким образом, общее изменение численной концентрации вещества i на поверхности пыли $[dn_s(i)/dt]_{tot}$ и в толще мантии $[dn_m(i)/dt]_{tot}$ соответственно даются уравнениями

$$\left[\frac{dn_s(i)}{dt} \right]_{tot} = \left[\frac{dn_s(i)}{dt} \right]_{chem} - \left[\frac{dn_s(i)}{dt} \right]_{tran} - R_{swap,s}(i), \quad (5)$$

$$\left[\frac{dn_m(i)}{dt} \right]_{tot} = \left[\frac{dn_m(i)}{dt} \right]_{chem} + \left[\frac{dn_s(i)}{dt} \right]_{tran} - R_{swap,m}(i). \quad (6)$$

Разработанная трехфазная астрохимическая модель демонстрирует согласие в результатах с аналогичной трехфазной моделью [8]. Выбран «низкометаллический» начальный элементный состав [3], стадия молекулярного облака длится 10^6 лет, химическая эволюция рассчитывается для плотности газа 10^4 см^{-3} и температуры газа и пыли 10 К.



Поверхностная концентрация атомарного кислорода в двух- и трехфазной моделях

Результаты моделирования

В модельных физических условиях молекулярного облака около половины всех поверхностных веществ эффективно уходят в толщу мантии — в частности, О, СО, ОН, Н₂СО (прекурсор метанола). Разница концентраций одного и того же вещества на пыли в двух- и трехфазной моделях может превышать 10 порядков. Так, на временах порядка 10^5 лет убыль атомарного кислорода (см. рисунок) на поверхности пыли в двухфазной модели обусловлена в основном реакциями $\text{gO} + \text{gHNO} \rightarrow \text{gNO} + \text{gOH}$, $\text{gO} + \text{gO}_2 \rightarrow \text{gO}_3$ и $\text{gH} + \text{gO} \rightarrow \text{gOH}$. В трехфазной модели атомарный кислород эффективно уходит из поверхностных слоев в толщу мантии, где скорости упомянутых реакций на порядки ниже. Вместе с тем концентрации таких поверхностных веществ, как СО₂ или Н₂О, практически совпадают с аналогичными двухфазными концентрациями на всем времени моделирования.

В отличие от исходной двухфазной модели, где $\text{gCO} : \text{gH}_2\text{O} = 10^{-4}$, в трехфазной концентрация СО на пыли по отношению к концентрации водяного льда находится в согласии с наблюдениями — $\text{gCO} : \text{gH}_2\text{O} = 0.29$. Для сравнения: в [2] $\text{gCO} : \text{gH}_2\text{O}$ составляет 0.29

для окрестностей маломассивных протозвезд и 0.31 для ядер облаков. Из-за ухода в толщу мантии CO не столь эффективно превращается в метанол, и концентрация метанола в трехфазной модели ниже, чем в двухфазной, — $\text{gCH}_3\text{OH} : \text{gH}_2\text{O} = 0.12$. Это выше, чем в большинстве наблюдаемых объектов (0.03–0.04), хотя в отдельных случаях содержание метанола во льду может превышать 10 % [2]. Имеет место недостаток CO₂ на пыли: по наблюдательным данным [1, 2] $\text{gCO}_2 : \text{gH}_2\text{O}$ составляет 0.2–0.3, а в нашей трехфазной модели 0.002. Отметим, что в настоящей работе моделируется молекулярное облако без звездообразования, а в наблюдаемых объектах [1, 2] процессы звездообразования имеют место.

При повышении температуры газа и пыли CO на поверхности пыли конвертируется в CO₂ более эффективно, а меньшая длительность стадии молекулярного облака способствует тому, что поверхностный CO не успевает перейти в метанол. К примеру, для температуры 16 K и длительности стадии молекулярного облака 2×10^5 лет получаем соотношения $\text{gH}_2\text{O} : \text{gCO} : \text{gCO}_2 : \text{gCH}_3\text{OH} = 100 : 23 : 23 : 1$, что близко к наблюдательным данным.

Заключение

Выделение глубинных слоев ледяной мантии в отдельную фазу приводит к существенным изменениям в концентрации поверхностных веществ и к согласию с наблюдениями CO на пыли. Повышение температуры в пределах допустимых для стадии молекулярного облака значений и сокращение времени химической эволюции способно приблизить поверхностные концентрации метанола и CO₂ на пыли к наблюдаемым в молекулярных облаках.

Автор признателен Правительству Российской Федерации и Министерству высшего образования и науки РФ за поддержку, грант 075-15-2020-780 (N13.1902.21.0039).

Библиографические ссылки

- [1] *Goto M., Bailey J. D., Hocuk S. et al.* The first frost in the Pipe Nebula // *Astron. Astrophys.* — 2018. — Vol. 610. — P. A9.
- [2] *Öberg K. I., Boogert A. C. A., Pontoppidan K. M. et al.* The Spitzer ice legacy: ice evolution from cores to protostars // *Astrophys. J.* — 2011. — Vol. 740, № 2. — P. 109.
- [3] *Wiebe D. S., Molyarova T. S., Akimkin V. V. et al.* Luminosity outburst chemistry in protoplanetary discs: going beyond standard tracers // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 2019. — Vol. 485, № 2. — P. 1843–1863.
- [4] *Semenov D., Wiebe D.* Chemical evolution of turbulent protoplanetary disks and the solar nebula // *Astrophys. J. Suppl. Ser.* — 2011. — Vol. 196, № 2. — P. 25.
- [5] *Garrod R. T.* A three-phase chemical model of hot cores: the formation of glycine // *Astrophys. J.* — 2013. — Vol. 765, № 1. — P. 60.
- [6] *Hasegawa T. I., Herbst E.* Three-phase chemical models of dense interstellar clouds — gas dust particle mantles and dust particle surfaces // *Mon. Not. R. Astron. Soc.* — 1993. — Vol. 263. — P. 589.
- [7] *Garrod R. T., Pauly T.* On the formation of CO₂ and other interstellar ices // *Astrophys. J.* — 2011. — Vol. 735, № 1. — P. 15.
- [8] *Vasyunin A. I., Caselli P., Dulieu F., Jiménez-Serra I.* Formation of complex molecules in prestellar cores: a multilayer approach // *Astrophys. J.* — 2017. — Vol. 842, № 1. — P. 33.